Agilent MSD Productivity ChemStation GC、GC/MS システム用

カタログ

概要

Agilentの質量選択検出器（MSD）用Productivity ChemStationは、GC/MSの分析、データ処理、レポート作成に関するあらゆる作業のためのすべての機能を備えた32ビット統合ガスクロマトグラフィ/質量分析（GC/MS）ソフトウェアアプリケーションです。Windows® 2000およびWindows XP®でサポートされ、複数のGC/MSおよびGCを制御するこのMSD Productivity ChemStationソフトウェアは、下記の機能を含むソフトウェアモジュールで構成されます。

- 装置（GC、MSD、オートサンプラ）の集中制御
- データ解析（GCデータ、MSデータ、およびGCとMSの統合データ）
- 統合化システムオートメーション
- 各種カスタムレポート
- マクロプログラミング
- ユーザー側で定義できるセキュリティ
- ソフトウェアバリデーションツール

MSD Productivity ChemStationは、サンプルの導入から最終的なレポート作成までの分析プロセスを統合、簡素化し、研究施設の生産性を最大化するために必要なツールを提供します（図1）。

enhanced 21 CFR Part 11コンプライアンスのAgilent MSDセキュリティケミステーション(G1732AA)は、データの完全性の確保、高度なセキュリティ、監査証跡、およびレポート作成を比類のないレベルで実行します。

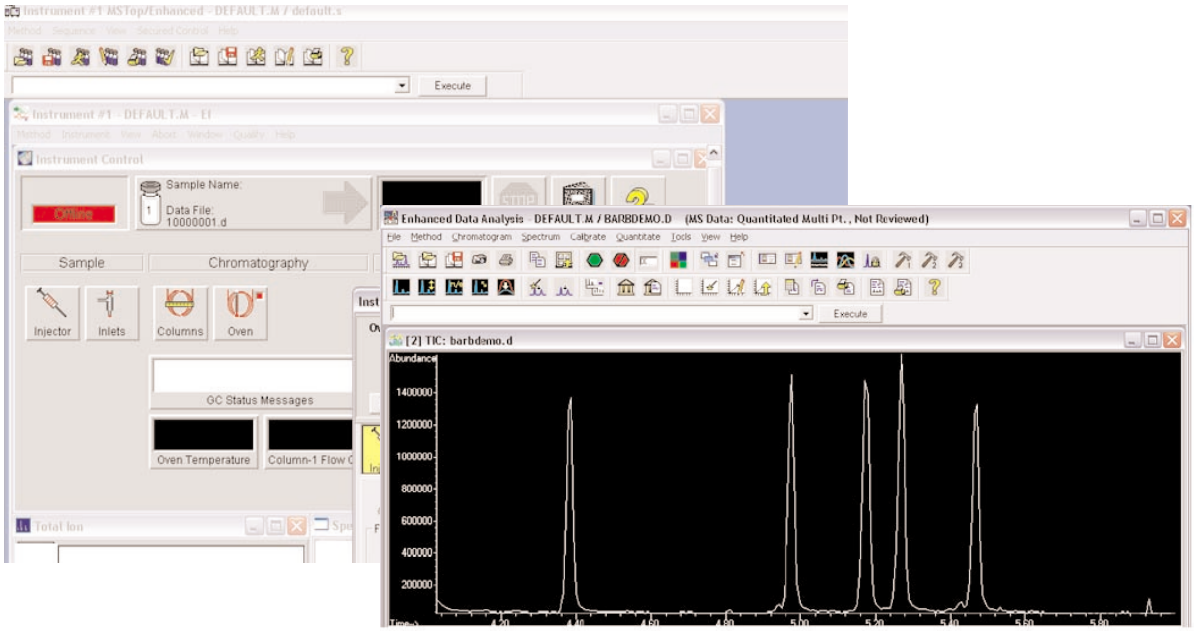


図1： MSD Productivityソフトウェアは、サンプルの導入から最終的なレポートの作成までの多数のアプリケーションが１つに統合されています – ソフトウェアはシームレスに機能してユーザーのニーズにお応えします。

Agilent Technologies

複数の機器の制御、複数のユーザーによる使用が可能

このソフトウェアは、スーパーバイザーとユーザーに付与されるアクセス権を独自に設定できる複数ユーザー環境の研究施設に適しています。メソッドは、変更できないようにセキュリティ機能で保護できます。複数のユーザーが使用する環境ではメンテナンス作業が忘れられがちです。早期メンテナンスフィードバック機能は、使用の度合いが一定のレベルに達するとユーザーに通知します。メンテナンスの方法はビデオで説明します。

このソフトウェアは、作業を自動化し、生産性を高めることを目的として設計されています。ラボ情報マネージメントシステム（LIMS）のサンプルリストをダウンロードしてオートサンプラのシーケンスを作成できます。自動化されたプレランとポストランのプロシージャは、データの評価および検証作業を簡素化します。各種カスタムレポートを作成できます。エキスパートユーザーがプロセスの自動化やメニュー項目の変更、あるいはその他のカスタマイゼーションを行えるように、マクロ言語が用意されています。

ソフトウェアのインターフェースとヘルプには英語バージョンと日本語バージョンがあります。中国語バージョンのヘルプも用意されています。

先進の自動化機能

このソフトウェアは、各種ウィザードや自動化機能のみでなく、繁雑な操作を簡素化する各種ツールを搭載しています。さまざまなデータの入力を必要とする複雑な作業は、先進の自動化機能によって簡素化されています。

キャリブレーションテーブルの自動セットアップ（AutoQuant Setup）

AutoQuant Setupを使用すれば、ソフトウェアに関する最低限の知識しかなくても速やかにGC/MSキャリブレーションをセットアップできます。AutoQuant Setupを選択した場合は、AutoQuantがトータルイオンクロマトグラムで積分された個々の化合物毎に、選択されたMSスペクトルデータベースから化合物名を検索し、最初にヒットした4つの化合物の名前を候補として提示します。ユーザーが関心を持つ化合物の名前を選択するか、またはユーザーが定義した名前を入力すると、ソフトウェアが自動的にターゲットイオンと3つのクオリファイヤイオンを選択します。化合物やキャリブレーションのその他の編集も簡単に行うことができます（図2）。

選択イオンモニタ（SIM）メソッドの自動化

複雑なSIMメソッドを手作業で設定することは容易ではありません。個々の化合物ごとに保持時間（RT）やイオンを入力する必要があります。MSD Productivity ChemStationは、このプロセスを簡素化します。ソフトウェアは、注入された標準試料からRT、選択イオン、同定比を取り出してSIMメソッドを作成します（図3）。

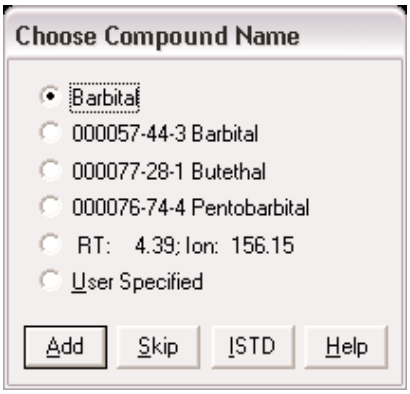


図2： AutoQuant Setupを使用するとGC/MSキャリブレーションテーブルを簡単に作成できます。

リテンションタイムロッキング（RTL）

RTLメソッドはRTを一定に保ちます。メンテナンス作業を実施した後やメソッドを他の装置に移転した場合にメソッドのRTを編集する必要はなくなります。

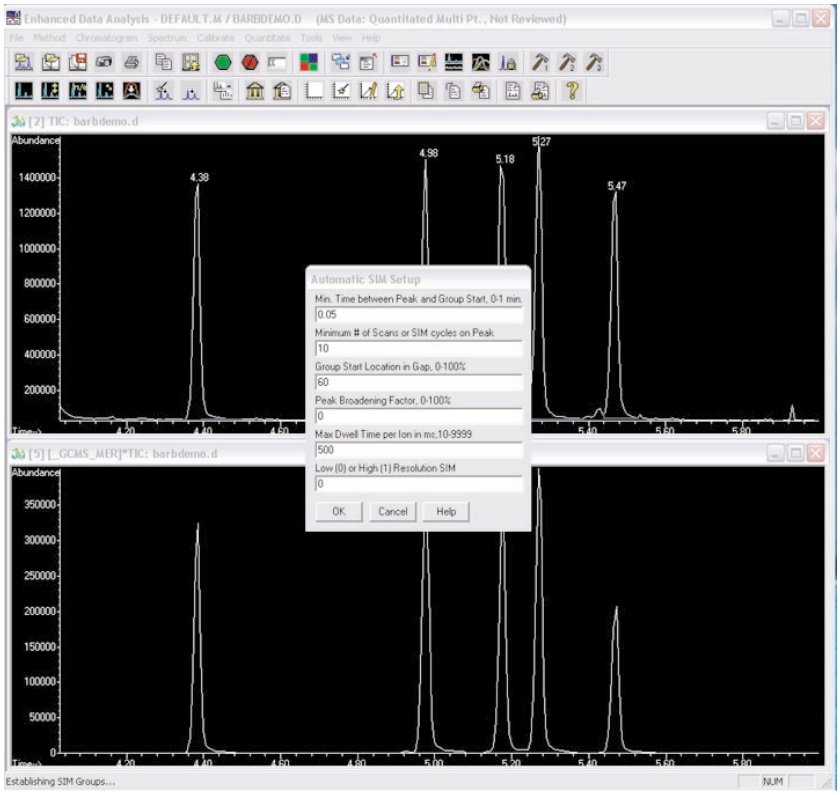
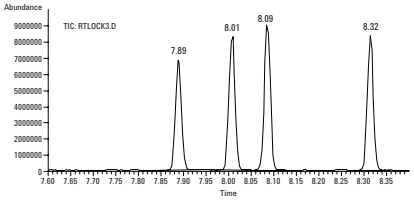


図3： Automatic SIM Setup 機能を使用すると、定量メソッドから自動的にSIM取り込みメソッドを生成できます。

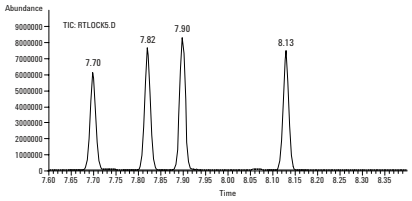
RTが変化しないため、RT にスペクトルデータを対応させてデータベースを作成し、さまざまなクラスの化合物をスクリーニングするのに利用できます。殺虫剤、多環芳香族、香料、脂肪酸メチルエステル（FAME）、法医中毒学、およびその他のクラスの化合物について、RTデータに質量スペクトルを対応させた各種 RTL データベースが用意されています。ユーザーは、自社で RTLデータベースやメソッドを作成して共有することもできます。

RTLを使用すると、カラムのトリミング後もRTを同じ値に維持したり、同じ製品番号のカラムを使う別の GC システムにメソッドを移転したとき、各化合物の RT をほぼ同じ値に一致させることができます。注入口圧力を調整することにより、1つのシステムのRTを別のシステムのRTと同じになるようにします。下の図は、カラムを変更した場合のRTのシフトがRTLで解決されるさまを示しています。

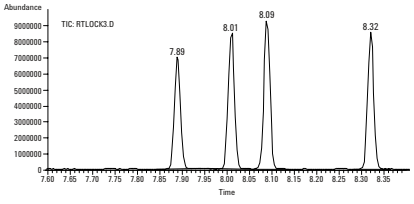
以前の状態



カラムのトリミング後



RTLによる再ロック後



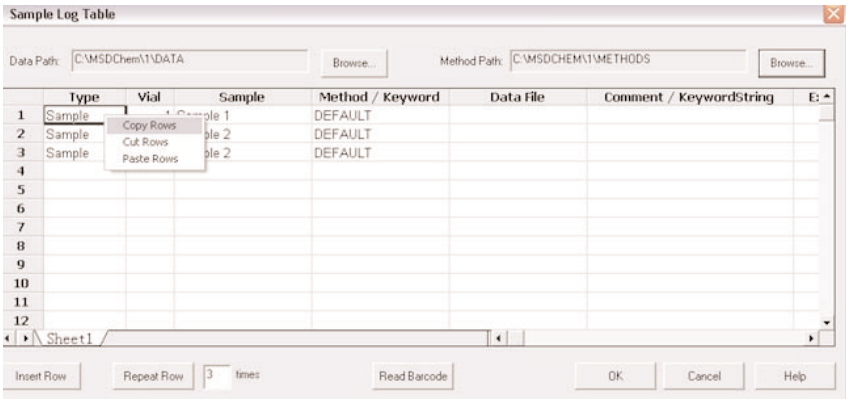


図4： 新しいスプレッドシート形式のサンプルログテーブルで大きなシーケンスも簡単に作成、編集できます。マウスの右ボタンをクリックすると、サンプルログテーブルの行のコピー、切り取り、貼り付けのコマンドを呼び出せます。

結果スクリーナー (Results Screener)

リテンションタイムロック機能を利用した収集データをスクリーニングすることにより、データベース中の多数の化合物を同定できます。スペクトルライブラリと照らし合わせて個々のピークを検索する必要はありません。RTとスペクトルの両方の特性を使用するため、より高い確度で同定できます。

インテリジェントシーケンス

中毒薬物試験では、キャリブレーション、クロマトグラフィ、スペクトルの結果に対するチェックが包括的な品質管理プロシージャの中に含まれ実施されます。MSD Productivity ChemStation ソフトウェアは、自動的にこれらのチェックを自動的に実行し、オートサンプラの注入シーケンスを変更して確証分析を行います（図4）。

特定アプリケーション用ソフトウェア

10年以上にわたって世界で最もポピュラーなGC/MSソフトウェアとして受け入れられてきたAgilentは、世界中のユーザーから数多くのフィードバックを受け取っています。ソフトウェアは、主要なアプリケーションの特別な要件に合わせて設定できます。一般的な拡張定量分析モードの他に、EnvironQuant、DrugQuant、およびaromatics in gasoline モードがあります。これらのモードではそれぞれ、そのアプリケーションに特有の入力項目やレポート書式を提供します。

規制へのコンプライアンス

このソフトウェアは、さまざまな用途における生産性および規制の要件を満たしています。薬物試験を行う研究所では、インテリジェントシーケンス機能を使用し、前回の注入の結果に基いて再注入/再分析を自動化することができます。製薬会社の研究施設であれば、21 CFR Part 11コンプライアンスパッケージ（Agilent MSD Security ChemStation, G1732AA）やIQ/OQサービスを追加できます。環境分析ラボであれば、DFTPP/BFB要件を満たすオートチューン機能、単一サンプルまたは複数サンプルによるQCレポートを作成できます。1つのソフトウェアでGCとGC/MSの両方に対応することで、ラボの運営を簡素化し、コストを削減できます。

環境関連のアプリケーション

- DFTPP/BFP基準に適合させるための自動チューニング
- 農薬および内分泌攪乱物質のRTLライブラリ（スペクトルおよびRT）
- 多環芳香族炭化水素（PAH）のRTLライブラリ（スペクトルおよびRT）
- 揮発性有機化合物（VOC）のRTLライブラリ（スペクトルおよびRT）
- ポリ塩化ビフェニール（PCB）コンジナーのRTLライブラリ（スペクトルおよびRT）
- USEPA CLP書式のレポート（暫定的に同定された化合物、複数サンプル、スパイクおよびその他のQCレポートを含む）

食品関連のアプリケーション

- FAMEのRTLライブラリ（スペクトルおよびRT）
- 香料のRTLライブラリ（スペクトルおよびRT）
- 農薬および内分泌攪乱物質のRTLライブラリ（スペクトルおよびRT）

法医中毒学のアプリケーション

- 法医中毒学のRTLライブラリ（スペクトルおよびRT）
- インテリジェントシーケンシング

石油化学関連のアプリケーション

- Reformulated gasoline analyses via ASTM-D5769-95

製薬関連のアプリケーション

- 濃度に基づく重み付けキャリブレーション
- 21 CFR Part 11コンプライアンスソフトウェア（オプション、Agilent MSD Security ChemStation, G1732AA）
- IQ/OQ/PVサービス（オプション）

機器の制御

- データシステムあたり2台までのGC/MS
- 最大で4つのGC検出器
- LANとGP-IB 5973xの両方の機器に接続
- 電子衝撃法（EI）、ポジティブ化学イオン法（PCI）、NCI、DFTPP、BFB で最大感度のための自動チューニング
- オートサンプラのバッチリストをファイルとしてダウンロード可能
- バーコードオペレーションをサポート
- プレランおよびポストランのマクロをシーケンスの一部として使用可能
- DrugQuantモードでは分析結果に基づいたサンプリングが可能
- 他のサンプラや装置を操作するための時間による開始/停止イベント

定性分析

- ピークピュリティソフトウェアで重なり合っているピークの検出が可能
- 確率によるマッチング（PBM）方式の検索アルゴリズムを標準装備。オプションとしてNISTデータベースの検索機能を使用可能。
- オプションのライブラリに含まれるライブラリ： NIST02、Wiley 7th、PMW drug、Stan pesticide
- 構造式ライブラリ（オプション）
- 農薬および内分泌攪乱物質のRTおよびスペクトルのデータベース（オプション）

定量分析

- 2000を超える化合物の定量が可能
- 20レベルのキャリブレーション
- GC向けおよびMS向けに最適化された積分アルゴリズム
- 多様な検査量線近似： 直線、二次曲線、平均応答係数、重み付け（いくつかのオプションでは強制的に原点交差）
- Quantエディタは抽出イオンクロマトグラフィ（EIC）、スペクトル、定量分析の結果を1つの画面に表示

セットアップの自動化

- 目標化合物のメソッド
- 自動化されたSIMメソッド
- RTL

カスタマイゼーション

- 主要な機器の読み取り値を1つの画面でモニタ
- プルダウンメニューの項目
- インジェクタ、ポンプのオイル交換、その他に関するメンテナンス時期の通知機能
- テキストとグラフィックスを組み合わせたカスタムレポート
- クロマトグラフィやスペクトルのデータ用に設計されたマクロ言語を使用してプロセスを自動化

ユーザー側で定義できるセキュリティ機能

- マネージャおよびユーザーのレベル
- オプションの21 CFR Part 11コンプライアンスソフトウェア（Agilent MSDSecurity ChemStation, G1732AA）

ユーザー支援

- MS Basicsコンピュータを使用した講習
- バージョン別の、英語、日本語、または中国語のオンラインヘルプ
- ビデオとテキストの両方でメンテナンスの方法を説明
- ソフトウェアのパッチをWebサイト経由で提供
- ユーザーコントリビュートソフトをWebサイト経由で提供

詳細な情報については...

Agilent 製品のさらに詳細な情報については、弊社ウェブサイトをご覧ください。
http://www.agilent.com/chem/jp

お問い合わせは： 0120-477-111
横河アナリティカルシステムズ株式会社
〒192-0033 東京都八王子市高倉町 9-1

本資料に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。Agilent Technologies は、万一この資料に過誤を含む記述が発見された場合、また、装丁、説明の巧拙等を含めて本資料の使用により付随的または間接的に損害が発生する事態が発生したとしても一切免責とさせて頂きます。

© Agilent Technologies, Inc. 2004

Printed in the USA
June 14, 2004
5989-0812JAJP